



TITLE:

5.分子性結晶に於ける配向構造相  
転移の理論的研究Alkali  
superoxides系の相転移(関西学院大  
学理学研究科,修士論文アブストラ  
クト(1979年度))

AUTHOR(S):

楠田, 幸久

---

CITATION:

楠田, 幸久. 5.分子性結晶に於ける配向構造相転移の理論的研究Alkali superoxides系の相  
転移(関西学院大学理学研究科,修士論文アブストラクト(1979年度)). 物性研究 1980, 34(2):  
207-207

ISSUE DATE:

1980-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/90094>

RIGHT:

初めに結晶格子一般の示す非調和現象である熱膨張と融解を論じる。融解に伴う膨張率の異常ならびに半無限結晶に於ける表面効果の異常侵入を詳しく議論する。一方、有限系としての微粒子の融解をも我々の理論の枠内で厳密に取り扱い、その融点の粒径依存性を考察する。次に、“秩序の融解”という立場から配向一回転系の相転移理論を提案する。そのような観点から簡単な模型について導出された結果は、いわゆる整合相ばかりでなく、不整合相に対応する解をも含むものとなる。

## 5. 分子性結晶に於ける配向構造相転移の理論的研究

### Alkali superoxides 系の相転移

楠 田 幸 久

本講演では、高温相（I相）でNaCl型の構造を持ち、多くの逐次相転移を起こす Alkali superoxides :  $XO_2$  ( $X=Na, K, Rb, Cs$ ) のI相からII相への相転移に対する理論的考察を行う。II相構造は、固体水素型の配向をとる  $NaO_2$  と、結晶軸方向に  $O_2$  分子がそろった  $K(Rb, Cs)O_2$  の両型に分けられる。高温構造を基礎にして、 $X^+$  ion を点電荷、 $O_2^-$  分子を両端に反撥中心を持つ亜鈴状分子と看做し、静電相互作用と最近接  $X^+ - O_2^-$  間の短距離反撥力を考慮する。これらの相互作用のもとでの最安定配向を調べ、有効電荷と短距離反撥力のパラメータの変化によって、 $KO_2$  型、 $NaO_2$  型の配向が、エネルギー的に安定になることを示す。

## 6. 水・アルコール類二成分系結晶の研究

山 本 重 和

アルコール類水溶液を冷却した時に析出する結晶は、六角形結晶（構成要素は水）と立方晶形結晶の二種に大別できる。後者は、ethanol, 1-propanol, 2-propanol の水溶液中に析出する。立方晶形結晶の中でも 2-propanol 水溶液に析出するものだけが、 $-51^\circ C \sim -52^\circ C$  で相転移を起こし、低温相では複屈折を呈することが知られている。またこの結晶中の 2-propanol と水とのモル比は、ほぼ 1 : 3 である。ethanol と 1-propanol の場合の結晶の組成を